ПОШУК ХІМІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ В СТРУКТУРНИХ БАЗАХ ДАНИХ У ПРОЦЕСІ НАУКОВОЇ РОБОТИ СТУДЕНТІВ

Федько Н.Ф., доцент, **Ведута В.В.**, доцент
кафедра органічної та фармацевтичної хімії
Одеський національний університет імені І.І. Мечникова

У період виконання експериментальної дипломної роботи з хімії кожен студент за допомогою наукового керівника має сформувати індивідуальну систему пошуку інформації, яка включає різні способи та прийоми. Відпрацьована система пошуку дозволяє з найменшими витратами сил і часу відбирати матеріали з конкретної теми, оперативно та повно вилучати і аналізувати необхідні відомості. Надзвичайно корисними для пошуку інформації про методи синтезу хімічних речовин є структурні бази даних, в яких саме структура сполуки є первинним ідентифікатором в конструкції всього інформаційного масиву. Як правило, кожна така база даних має свій пошуковий інструмент з використанням різноманітних аплетів (JSME, JS Draw, Marvin JS та ін.), за допомогою яких шукач вводить як запит двовимірну структурну формулу хімічної речовини.

На нашу думку, доцільно навчити студента при пошуку методик синтезу органічних сполук користуватись наступними безкоштовними базами даних:

- *Organic Chemistry Portal* – інформація про перетворення органічних сполук оформлена у вигляді міні оглядів у розділі *Organic Chemistry Highlights*, а також в формі багаторівневого каталогу в розділі *Organic Synthesis Search*. Приводяться не методики синтезу, а загальні принципи отримання сполук з посиланнями на першоджерела. В оглядах публікуються нові розробки та не розглядаються методики, які були опубліковані в минулому. База даних дозволяє проводити пошук способів синтезу сполуки з заданим хімічним зв’язком, який утворюється в результаті реакції, та пошук бібліографічних описів статей, в яких розміщені відповідні методики синтезу.
- *Organic Syntheses* – багатотомний збірник вивірених методик синтезу органічних сполук з бібліографічними посиланнями на першоджерела. Відтворюваність кожної методики перед публікацією перевіряється не менше двох разів в лабораторіях членів редколегії. *Organic Syntheses* публікується в формі щорічних збірників (*Annual Volume*, з 1921 р.), статті повторно публікуються в звідних томах (*Collective Volume*).
- *ChemSpider SyntheticPages* – інтегрована в *ChemSpider* база даних методик органічного синтезу. Повний текст запису містить детальний опис методики, відомості про реагенти, фізико-хімічні та спектральні властивості продукту реакції, коментарі автора та читачів, бібліографічні посилання на першоджерела, графічні файли спектрів отриманої речовини.
- *ChemSynthesis* – бібліографічна база даних з інформацією, зібраною з 12 авторитетних хімічних журналів. База містить більш ніж 40000 хімічних сполук з посиланнями на методики їх синтезу та фізичні властивості (температура плавлення, температура кипіння, густина та ін.).